

# 1

## Modelos de combustión y fuego

*Amable Liñán*

1. Introducción
2. La producción y el movimiento de los humos
3. Ensayos en modelo reducido
4. Pruebas en túneles de ensayo
5. Ensayos en túneles abandonados
6. Sistemas de seguridad en túneles
7. Referencias



Amable Liñán Martínez.

Profesor Dr. Ingeniero Aeronáutico.

- Premio Príncipe de Asturias de investigación científica y técnica.
- Académico de la Real de Ciencias y de la Ingeniería.
- Miembro asociado extranjero de la Academia de Ciencias Francesa.

# Modelos de Combustión y fuego

Aunque la charla de hoy se refiere a los temas más desagradables de nuestra relación con el fuego, conviene hacer notar las aplicaciones prácticas que el hombre, desde que Prometeo se lo robó a los dioses, ha dado a la combustión que podrían ser representadas por el fuego del hogar como el representado en la Figura 1.a.

Como se observa en detalle (Figura 1.b) una característica clave a la hora de su modelización estriba en el reconocimiento del carácter caótico del movimiento de los gases quemados. Este carácter caótico contribuye a nuestra fascinación por el fuego pero también a las dificultades de su conocimiento y control.

El conocimiento que el hombre tiene se inició hace ya medio millón de años, cuando aprendió a mantener el fuego, encendido por las chispas de las tormentas, evitando su extinción. Más tarde entendió, posiblemente cuando estaba fabricándose herramientas de piedra, cómo podía producir de un modo controlado su ignición (transformando energía mecánica en térmica).

El hombre descubrió pronto las posibilidades que le ofrecía el fuego para calentar e iluminar las cuevas donde vivía y, posteriormente, para transformar los alimentos y los materiales que utilizaría para la fabricación de herramientas y armas. La importancia que para el hombre tuvo este conocimiento del fuego está recogida en el mito de Prometeo.

El conocimiento empírico que el hombre tiene del fuego está bien resumido en la definiciones que el Diccionario de la Real Academia Española da del *fuego*, y de las palabras *llama* y *combustión* que aparecen en la definición.



Figura 1a y 1b.



Figura 2.

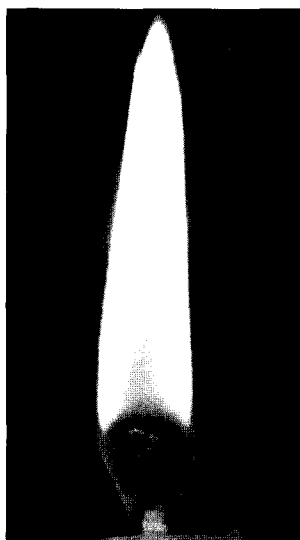


Figura 3.

De acuerdo con el Diccionario de la Real Academia Española, el *fuego* es la combustión que se manifiesta con desprendimiento de luz, calor intenso y frecuentemente llama, aunque existen ejemplos (como la combustión latente llamada *smouldering* en inglés) donde no existe llama gaseosa (recuérdese el caso de los cigarrillos).

La *llama* es la masa gaseosa en combustión que se eleva de los cuerpos que arden y despiden luz de colores variados. *Combustión* es la acción o efecto de arder o quemar, mediante una reacción química entre el oxígeno y un material oxidable, acompañada de desprendimiento de energía y que habitualmente se manifiesta por incandescencia o llama. A Lavoisier (1775) debemos esencialmente esta definición, que resumiremos diciendo que la combustión es una reacción química que ocurre generalmente en fase gaseosa, entre un combustible (como el carbón, los hidrocarburos líquidos o el gas natural) y el oxígeno del aire. La reacción genera calor y radiación luminosa. Con ella Lavoisier (Figura 3) inició no sólo la ciencia de la combustión sino también la química.

Entre los múltiples descubrimientos obtenidos por Lavoisier a través de cuidadosas medidas de los procesos de combustión, figura la aplicación del principio de conservación de la masa tanto de forma global como local, en las reacciones químicas. Junto con Laplace, Lavoisier inició los estudios más importantes de Calorimetría y mostró la semejanza entre las reacciones químicas de combustión y el funcionamiento del cuerpo humano, donde los alimentos son convertidos en energía.

Uno de los subproductos más importantes de la combustión en relación con el tema que nos ocupa es el monóxido de carbono CO, principal responsable de las muertes debidas a incendios por sustitución del oxígeno que transporta la hemoglobina de la sangre y que produce la muerte por asfixia. De hecho se admite que el CO produce el 75% de las muertes en incendios que se estiman alrededor de 100.000 al año en todo el mundo.

De nuevo no obstante querría recordar los efectos benéficos de la combustión, para lo que basta tener presente que el 80% de la energía mundial se obtiene gracias al consumo de unos 7.000 millones de toneladas anuales de combustible, cuya quema controlada genera CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>O junto con cantidades mil veces menores de contaminantes como el CO y NO.

Uno de los fenómenos más cotidianos es la llama de las velas (Figura 3) cuyo análisis permitió a Faraday iniciar la comprensión de los procesos que en ella se llevan a cabo.

La cera se funde y sube por capilaridad hasta la parte superior de la mecha donde debido a los fenómenos de radiación y convección se produce la gasificación. Los vapores ascienden por flotabilidad y ello crea una depresión que aproxima el oxígeno a la zona de combustión.

La Figura 4 pretende poner de manifiesto la importancia de la fluido-dinámica en los procesos de combustión y la interacción con el cambio de orientación de la llama.

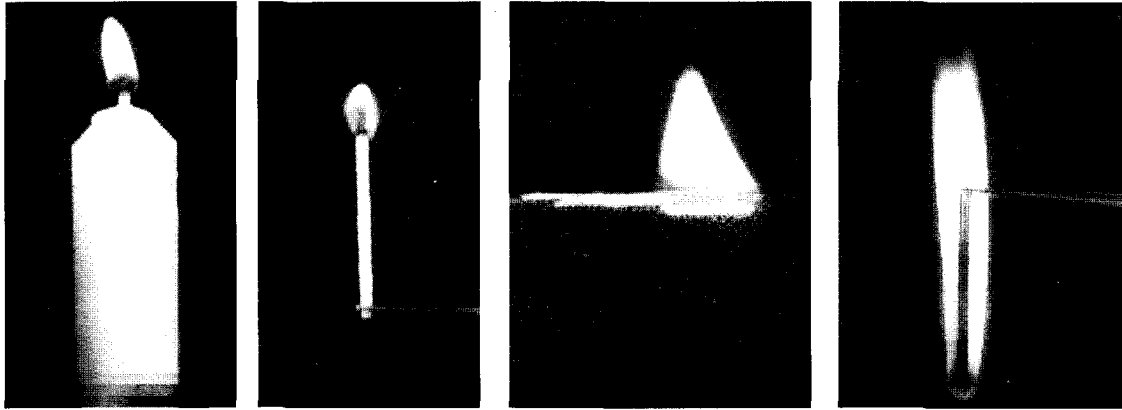


Figura 4.

En realidad, la reacción entre el combustible y el oxígeno tiene lugar en una capa delgada de reacción, o llama de difusión, que separa una región interior, donde no llega el oxígeno pues ha sido consumido en la llama. En esta región encontramos una fracción de los productos calientes de la combustión (principalmente  $\text{CO}_2$  y  $\text{H}_2\text{O}$ ) coexistiendo con el combustible, así como hollín, partículas sólidas, que por incandescencia a altas temperaturas dan lugar a la radiación que le da el carácter amarillento a la región interior, caliente, de las llamas de difusión. En esta región encontramos también el CO (monóxido de carbono) producido en la llama delgada de difusión. En la región exterior de la llama de difusión, tanto el monóxido de carbono como el hollín pueden reaccionar con el oxígeno ambiente en una capa delgada adyacente a la llama de difusión. Como consecuencia, si hay suficiente oxígeno exterior y no se reduce de modo importante la temperatura de la llama no encontraremos cantidades apreciables de hollín y CO fuera de la llama de difusión.

Pondremos como ejemplo de las ecuaciones que gobiernan el principio de conservación de la masa (Tabla I) que se cumple en todo el dominio fluido.

### Ecuaciones de conservación de la masa de las especies $\alpha$

$$\frac{f}{ft}(\rho Y_\alpha) + \text{div}\{\rho Y_\alpha (\vec{v} + \vec{v}_{d\alpha})\} = w_\alpha$$

$$Y_\alpha \vec{v}_{d\alpha} = -D_\alpha \text{grad } Y_\alpha \rightarrow v_{d\alpha} \cup \frac{D_\alpha}{L} \quad R_r = N^\circ \text{ de REYNOLDS} = \frac{UL}{D_\alpha} = \frac{\text{veloc. caract.}}{\text{veloc. difusión}}$$

$$w_\alpha(P, T, Y_\beta) \rightarrow w_\alpha \cup \frac{\rho}{t_q} \quad D_\alpha = N^\circ \text{ de DAMKÖHLER} = \frac{L}{Ut_q} = \frac{\text{tiempo de residencia}}{\text{tiempo de reacción}}$$

Ejemplo de reacción química:  $\text{CH}_4 + \text{H} \rightarrow \text{CH}_3 + \text{H}_2$

$$w_{\text{CH}_4} = -Ae^{-\frac{E}{RT}} n_{\text{CH}_4} n_{\text{H}} = -\frac{\rho^2}{16} e^{-\frac{E}{RT}} Y_{\text{CH}_4} Y_{\text{H}}$$

Tabla I.

El primer término representa la acumulación por unidad de tiempo, en la unidad de volumen, de la masa, de la especie producto de la densidad por la fracción másica  $Y_\alpha$ . El segundo término representa la masa que sale de la unidad de volumen transportada por convección con la velocidad  $\vec{v}$  y por difusión con la velocidad  $\vec{v}_{d\alpha}$ . En la derecha aparece la producción  $w_\alpha$  de la especie por la reacción química.

En la Tabla I aparecen estimaciones de los órdenes de magnitud de los términos que intervienen en la ecuación del balance de masa. Aparecen dos parámetros de gran importancia, el número de Danköhlér que relaciona los tiempos de residencia y reacción y el número de Reynolds, que establece la relación entre la velocidad del fluido y la de difusión, y que, como es sabido, cuando tiene valores muy altos indica que el flujo es de tipo turbulento.

Las reacciones químicas provocadas por las colisiones inelásticas entre las moléculas reactantes incluidas las especies intermedias y radicales que aparecen en el curso de la reacción están representadas por las reacciones elementales que aparecen en el esquema cinético detallado. En la Tabla II se presenta como ejemplo un esquema reducido para la reacción metano-aire.

$\text{CH}_4 + \text{H} \rightarrow \text{CH}_3 + \text{H}_2$	
$\text{CH}_3 + \text{O} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H}$	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} \rightarrow \text{HO}_2 + \text{M}$
$\text{CH}_2\text{O} + \text{H} \rightarrow \text{CHO} + \text{H}_2$	$\text{OH} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$
$\text{CHO} + \text{M} \rightarrow \text{CO} + \text{H} + \text{M}$	$\text{H} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{H}_2$
$\text{H} + \text{OH} \rightarrow \text{O} + \text{H}_2$	$2\text{H} + \text{M} \rightarrow \text{H}_2 + \text{M}$
$\text{CH}_4 + 2\text{H} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO} + 4\text{H}_2$	$\text{H} + \text{O}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{O}$
$\text{CO} + \text{OH} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}$	$\text{O} + \text{O}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{H}$
$\text{H} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{H}_2$	$\text{OH} + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{H}$
$\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$	$3\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{H}_2\text{O} + 2\text{H}$

Tabla II.

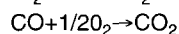
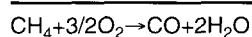
En este esquema cinético reducido aparecen un gran número de especies intermedias muy reactivas que por ello tienen concentraciones muy pequeñas, además de las especies principales  $\text{CH}_4$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{CO}_2$  y  $\text{H}_2\text{O}$ , que tienen las concentraciones más altas. Por ello podríamos pensar que se cumple la reacción global  $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$ ; sin embargo, algunas especies intermedias que aparecen en el curso de la reacción, como  $\text{H}$ ,  $\text{H}_2$  y  $\text{CO}$ , que no son tan reactivas como los otros radicales tienen concentraciones intermedias y juegan un papel importante en el curso de la reacción. El esquema cinético simplificado necesario para describir el curso de la reacción del metano con el aire en condiciones generales incluye las cuatro reacciones globales recuadradas en la Tabla II.

Con frecuencia las reacciones de oxidación del  $\text{H}_2$  y de recombinación del  $\text{H}$  son mucho más rápidas que las de oxidación global del  $\text{CO}$ , que se convierte en la especie intermedia con concentraciones mayores. Así pues, frecuentemente podemos reducir el esquema cinético de oxidación de hidrocarburos a un esquema de dos reacciones globales: una de oxidación parcial del combustible para quemar  $\text{CO}$  y  $\text{H}_2\text{O}$  y otra reacción de oxidación del  $\text{CO}$  para generar  $\text{CO}_2$ .

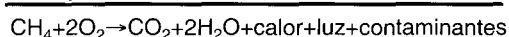
En el curso de la reacción también se produce  $\text{NO}$ , aunque en cantidades pequeñas comparables a las de  $\text{CO}$  por oxidación del nitrógeno.

Los esquemas cinéticos globales se recogen en la Tabla III que incluye también un esquema simplificado de los procesos de combustión de combustibles sólidos, como el carbón.

### MODELO CON DOS ETAPAS



### REACCION GLOBAL EN COMBUSTIÓN:



### CONTAMINANTES

Partículas (hollín y cenizas)

Hidrocarburos sin quemar

$\text{NO}_x$  (óxidos de nitrógeno)

$\text{SO}_2$  (dióxido de azufre)

CO (monóxido de carbono)

EFFECTO DE INVERNADERO  
( $\text{CO}_2$  y  $\text{CH}_4$ )

LLUVIA ÁCIDA  
(NO y  $\text{SO}_2$ )

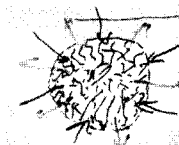
AGUJEROS DE OZONO  
(NO y Cl catalizan la  
recombinación del ozono)

### COMBUSTIÓN DE PARTÍCULAS DE CARBÓN

- Calentamiento por conducción y radiación
- Volatilización
- Combustión de residuo carbonoso

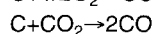
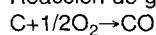
### ETAPA DE VOLATILIZACIÓN

GENERACIÓN DE  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{SO}_2$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{H}_2$



### ETAPA DE COMBUSTIÓN DE CARBONO

Reacción de gasificación



Fase gaseosa

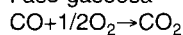


Tabla III.

En la combustión de sólidos hay una primera etapa de calentamiento hasta que al aumentar la temperatura se inicia la etapa de volatilización o generación sin necesidad de oxígeno, de sustancias volátiles algunas de ellas combustibles posteriormente en fase gaseosa. Después de esa etapa, se inicia la etapa de gasificación con  $\text{O}_2$  y  $\text{CO}_2$  del residuo carbonoso (char) que genera CO. Éste se oxida ya a fase gaseosa.

A continuación señalaremos el papel que tienen en los procesos de combustión el proceso fluido-dinámico de mezcla en fase gaseosa.



La gasificación previa era un fenómeno bien conocido cuando se usaban braseros y es la responsable del riesgo que produce el monóxido de carbono por ausencia de oxígeno.

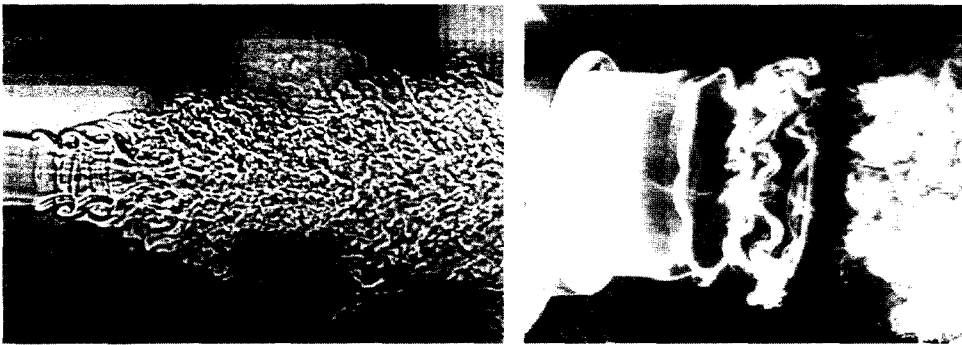


Figura 5.

En la Figura 5 se muestran las inestabilidades que encontramos en un chorro gaseoso, mientras que en la 6 se observan los vórtices responsables del proceso de mezclado entre dos corrientes paralelas.

Precisamente el fenómeno de mezcla de reactantes en flujo turbulento está gobernado por grandes torbellinos de estructura coherente, que pueden observarse en la imagen, que crecen por apareamiento, y no fueron descubiertos hasta los años setenta.

En la Figura 7 se muestra cómo es el proceso simultáneo de mezcla y combustión en llamas de difusión de un chorro gaseoso de propano en el aire.

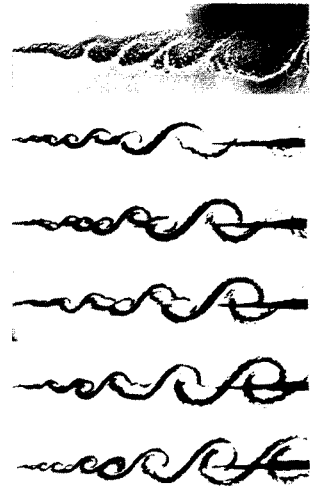


Figura 6.

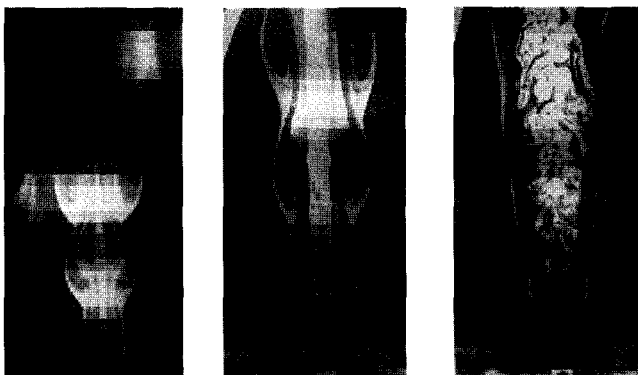


Figura 7.

En las figuras se muestra cómo va evolucionando el flujo al aumentar el número de Reynolds. La reacción química tiene lugar en una capa delgada de reacción (la llama de difusión) adonde llegan por difusión, en proporciones estequiométricas, desde fuera el oxígeno y desde dentro el propano. La llama está en el borde exterior de la zona amarillenta, consecuencia de la luz emitida por el hollín que no encontramos fuera de la llama.

Un parámetro fundamental que caracteriza las reacciones químicas es la relación estequiométrica  $S$  que indica la cantidad de aire necesario para quemar la unidad de masa de la corriente de combustible y que está alrededor de los 15 kg por quilo de combustible.

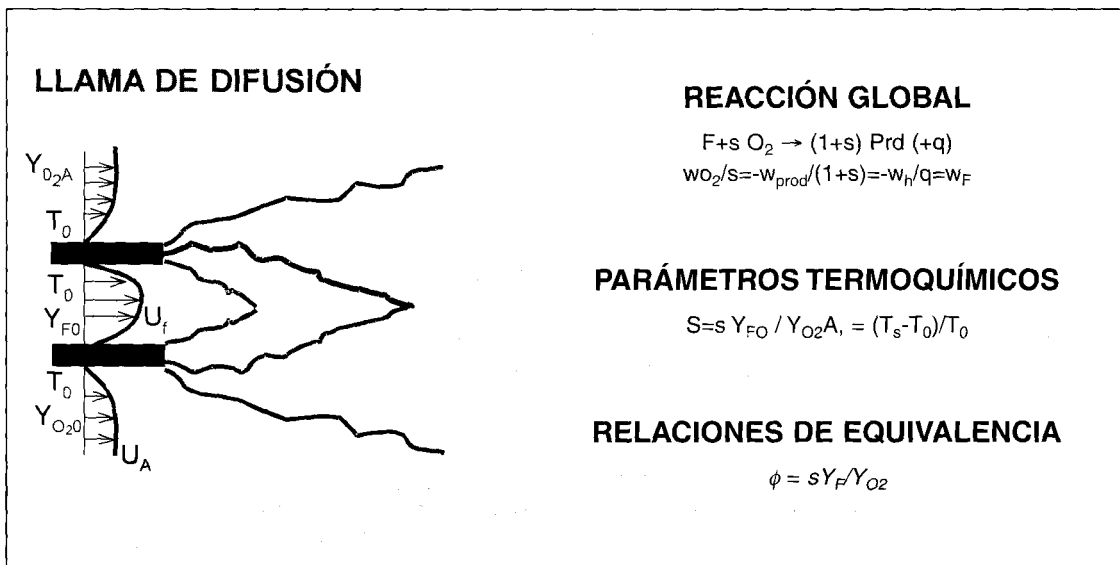


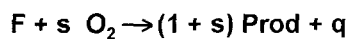
Figura 8.

Otro parámetro importante es el incremento de temperatura de la llama respecto a la temperatura inicial que suele presentar un valor de 6 a 7.

El ritmo de reacción (Tabla IV) viene condicionado por la temperatura y por el producto de las concentraciones.

## CINÉTICA QUÍMICA GLOBAL

- REACCIÓN GLOBAL DE ARRHENIUS



$$W_F = -\rho B e^{-E/RT} \leftarrow Y_F^{n_F} Y_{\text{O}_2}^{n_{\text{O}_2}}$$

- TIEMPO DE REACCIÓN

$$t_q^{-1} = B e^{-E/RT}$$

- TIEMPO DE RESIDENCIA

$$t_m = a / U_F$$

- NÚMERO DE DAMKÖHLER

$$Da = \frac{t_m}{t_q} = \frac{a}{U_F} B e^{-E/RT}$$

- REACCIONES DE COMBUSTIÓN

$$\gamma = \frac{T_s - T_0}{T_0} > 1 \quad ; \quad \frac{E}{RT} \gg 1$$

Tabla IV.

Estas magnitudes permiten comparar el tiempo químico con el tiempo de residencia y ver el efecto de las reacciones químicas.

Para reacciones con temperaturas bajas el tiempo químico puede tener valores del orden de días por lo que se obtienen mezclas de los reactantes sin efectos de las reacciones químicas. Sin embargo, a altas temperaturas con tiempos químicos del orden de los milisegundos las reacciones son muy rápidas, y la reacción química tiene lugar en una capa delgada, la llama de difusión que se muestra en la figura 8, que separa el combustible del oxígeno.

Si no se produce la ignición artificialmente, por calentamiento local de la mezcla, los reactivos se mezclan en un proceso de mezcla que será típicamente turbulento, tal como muestra la fotografía de la izquierda en la figura 9. Si por calentamiento local en algún punto (a ser posible de la superficie donde la mezcla sea estequiométrica) se produce la ignición, se generará un frente de combustión en forma de "llama premezclada" con un espesor de una décima de milímetro que avanza hasta que, como se muestra en la figura 9, se estabiliza, como una llama levitada, a una distancia del inyector; por debajo de la llama levitada coexisten, a temperaturas bajas el combustible y el oxidante. La llama premezclada como se muestra en la figura 10 deja detrás una llama de difusión.

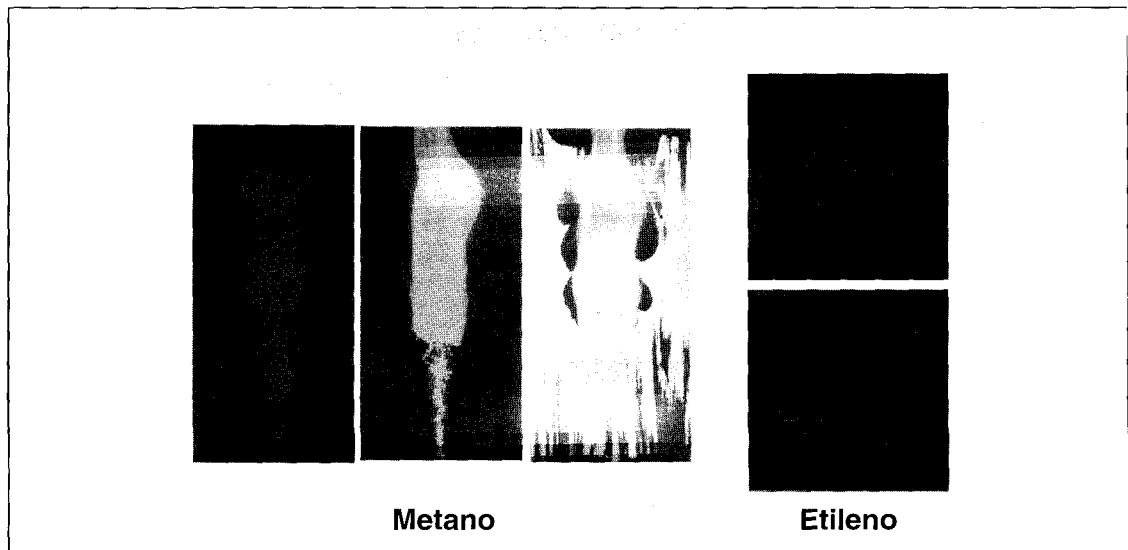


Figura 9.

En las fotografías de la Figura 9 se muestra con distintos procedimientos de visualización (por tomografía y fluorescencia) la estructura del flujo en la región de las llamas premezcladas levitadas (*lifted off*).

La Figura 10 muestra la capa de transición en llamas premezcladas o deflagraciones; a través de la cual la concentración de oxidante cae y la temperatura sube; las llamas se propagan a velocidades de 2 a 3 m/s. En la Figura 11 se recoge otro modo de combustión rápida, la detonación, con velocidades de unos 2.000 m/s y sobrepresiones del orden de 60 atmósferas. Aunque afortunadamente no son habituales su ocurrencia provoca graves daños.

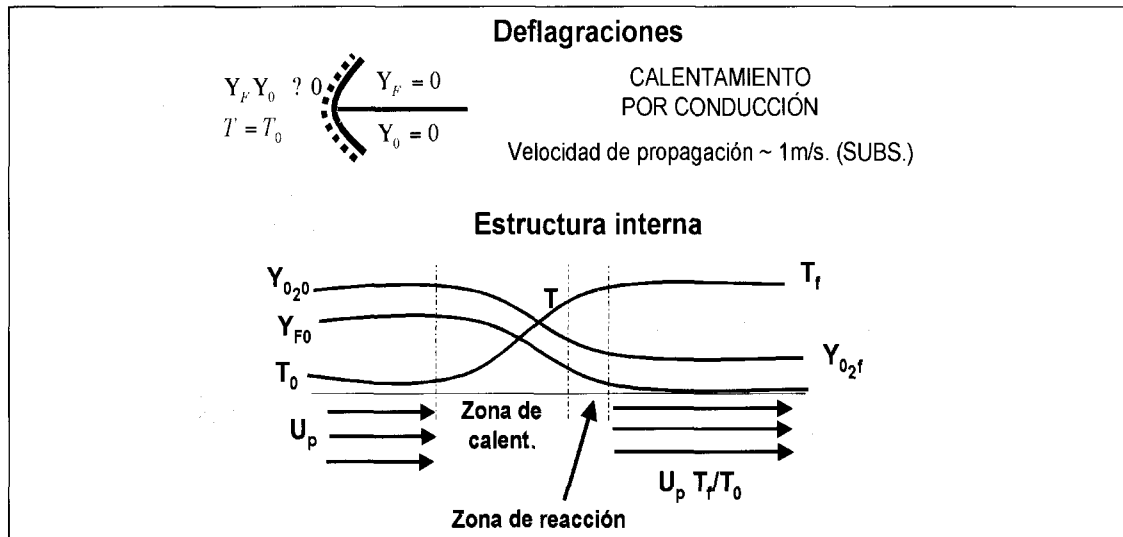


Figura 10.

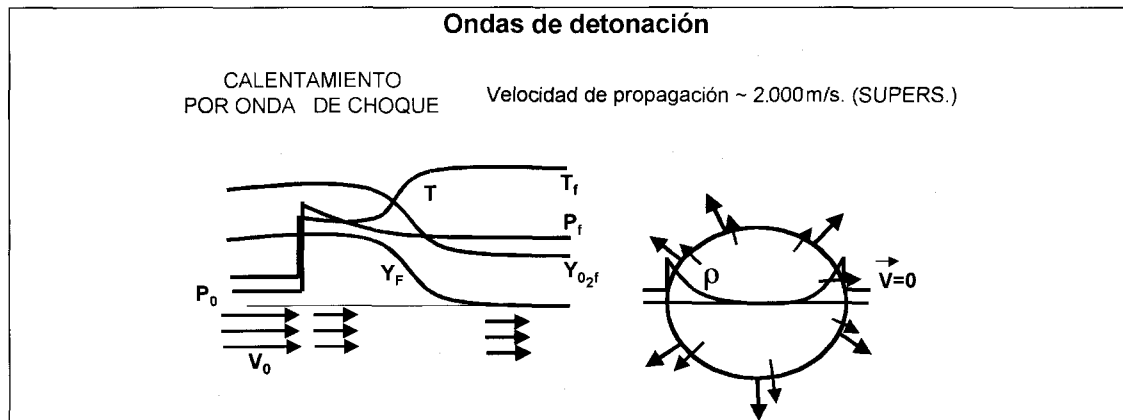
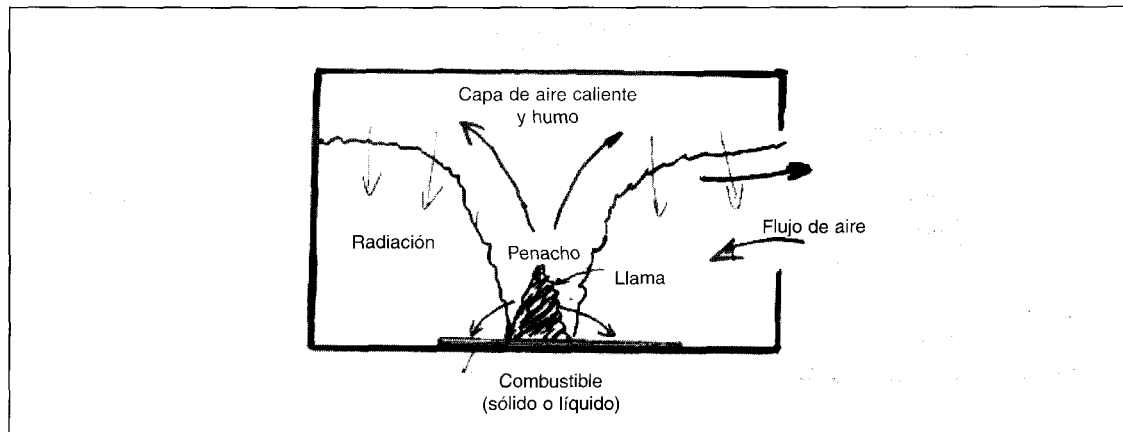


Figura 11.

En el caso de incendios en recintos confinados (Figura 12) la ignición provoca una llama de difusión en que los productos de combustión ascienden hasta el techo y generan un estrato caliente cuyo espesor aumenta con el tiempo.

Figura 12.



El tipo de fuego es distinto según que la llama de difusión esté debajo o dentro del estrato. En el primer caso sólo se generará  $\text{CO}_2$  y agua, sin producción de subproductos tóxicos. Sin embargo al aumentar el espesor del estrato la llama de difusión alcanza el estrato, con lo que el hollín y el monóxido de carbono, que coexisten con el combustible y el  $\text{CO}_2$  y el vapor de agua en el interior de la llama. De manera que cuando los gases de combustible entran en la zona estratificada, donde la falta de oxígeno evita la oxidación y provoca la permanencia de  $\text{CO}$ .

La capa estratificada con  $\text{CO}$  y hollín radia calor de forma muy efectiva al suelo lo que evapora una mayor cantidad de combustible, avivando y aumentando el tamaño del fuego y generando atmósferas inflamables.

Estos procesos pueden generar llamaradas con velocidades de 2 o 3 m/s que generan presiones de unos  $2.000 \text{ Kg/m}^2$  sobre las estructuras envolventes, lo que en caso de edificios es de gran importancia por oposición al de túneles donde el mayor problema es la nube de humos tóxicos que se genera.

En resumen, se puede decir que las etapas de fuego en recintos son las siguientes:

**IGNICIÓN:** Espontánea o provocada, pirólisis y generación y combustión de volátiles.

**CRECIMIENTO:** Transferencia de calor desde la llama a superficies combustibles próximas cuya temperatura sube hasta la temperatura de volatilización o evaporación. Formación de un penacho y capa de gases calientes con humo en el techo. Incremento de la radiación – gasificación – combustión y volumen de mezcla inflamable.

**LLAMARADA:** (o Flashover) Combustión rápida de la mezcla gaseosa inflamable.

FUEGO DESARROLLADO: La gasificación afecta a una superficie grande de combustible. La combustión limitada frecuentemente por el aporte de oxígeno.

## Agradecimientos

Quisiera agradecer a los miembros del Centro de Modelado en Ingeniería Mecánica (CEMIM) y en particular al ingeniero don Ignacio del Rey la ayuda prestada en la preparación de esta comunicación.

## Bibliografía

- F.A. Williams, Benjamin Cummings, *Combustion Theory*, 1985
- A. Liñan, *El papel de la mecánica de fluidos en los procesos de combustión*. Discurso de Ingreso en la Academia de Ciencias, 1991.
- C. D. Litton, M. Hertzberg y A. L. Furno, *The growth, structure and detectability of fires in mines in enclosures*, XVIII Symp. Int Combustions, págs. 633 a 639, 1981.
- W.H. Pitts, *The global equivalence ratio concept and the formation mechanisms of carbon monoxide in enclosure fires*, Progr. Energy Combust. Sci. Vol. 21, págs. 197 a 237, 1995.